

第1章 常微分方程式とその離散変数法

1.1 常微分方程式の起源

17世紀の微積分学の創始：その目的の一つ

I. NEWTON の動機：J. KEPLER によって法則化された天体の運動（Kepler の3法則）を、数学的物理学的に解明する

質点の位置座標 $\mathbf{x} = \mathbf{x}(t)$: 時刻 t の函数（空間の運動）

一階導函数 $\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \dot{\mathbf{x}}$: 運動の速度 $\mathbf{v}(t)$

二階導函数 $\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{d^2\mathbf{x}}{dt^2}$: 運動の加速度 $\mathbf{a}(t)$

Newton の第二運動法則：加速度 \times 質量 = 外力

外力がその位置座標の函数である（たとえば、重力場での運動）ならば

$$m \frac{d^2\mathbf{x}}{dt^2} = \mathbf{F}(t, \mathbf{x}) \quad (1.1)$$

$\mathbf{x}(t)$ が未知であるならば、これは未知函数とその導函数を含む（函数）方程式 functional equations.

簡単な例 ばね・質点系の運動

x : 質点の位置座標（1次元運動）

Hooke の法則：ばねの伸びに比例する力が（運動方向とは逆に）働く

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = -cx \quad (c: \text{ばね定数(正)}) \quad (1.2)$$

Newton の運動法則の数理的表現は微分方程式そのもの

$\rho(x, y, z)$: 3次元空間に分布する物質の質量（空間座標 (x, y, z) の函数）

様々な物理法則が（偏微分）微分方程式によって定式化。他にも、前章で触れたように、多くの現象が微分方程式を用いてモデリング

本講では、常微分方程式 ordinary differential equations (ODEs) と関連する微分方程式で表わされたモデリングを対象

注意 現実のモデリングで現われる微分方程式では、しばしばあるいは殆どすべての場合に解析的な解の表現は不可能か非効率的。したがって近似数値解法に対する高い需要

1.2 常微分方程式の初期値問題

常微分方程式の標準的な形式

独立変数を t , 従属変数を \mathbf{x} , 2変数函数 $\mathbf{f}(t, \mathbf{x})$ が与えられた方程式

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{f}(t, \mathbf{x}) \quad (1.3)$$

を, $\mathbf{x}(t)$ に関する常微分方程式という。

より正確には, 考察する独立変数の区間を $[a, b]$ と指定

$\mathbf{x}: [a, b] \rightarrow \mathbb{R}^d$ の函数

$\mathbf{f}: [a, b] \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ の函数

次元数 $d = 1$ のときは単独 (scalar) 常微分方程式

$d \geq 2$ のときは, 函数 $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_d)^T$ の第 i 成分の導函数 dx_i/dt が d 個の成分の函数として連立して与えられるので, 連立 (simultaneous) 常微分方程式あるいは常微分方程式系 (system of ODEs)

を考えている区間の上で少なくとも微分可能であり, 方程式 (1.3) を満たす函数 $\mathbf{x}(t)$ を, この方程式の理論解 (exact solution) あるいは単に解 (solution)

一般に方程式 (1.3) のみでは解を一意に決めることができない. 区間の右端 $t = a$ での函数値を指定する条件

$$\mathbf{x}(a) = \mathbf{x}_0, \quad \mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^d \quad (1.4)$$

を, 初期条件 (initial condition)

これを微分方程式 (1.3) に課したとき, 常微分方程式の初期値問題 (initial-value problem, IVP)

区間の両端で $\mathbf{x}(a), \mathbf{x}(b)$ から合計 d 個の値を指定する条件を二点境界条件 (two-point boundary condition)

これを微分方程式に加えた二点境界値問題 (boundary-value problem, BVP) は, しばしば初期値問題に還元して解かれる

初期値問題 (1.3), (1.4) にそもそも解があるのだろうか, あるいは解が存在するための条件は何であろうか

定理 1.1 (Peano の存在定理) ρ を正数とし, 函数 \mathbf{f} が領域

$$D = \{(t, \mathbf{x}) \mid a \leq t \leq b, \quad \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_0\| \leq \rho\}$$

で連続であって, さらにこの領域で $\|\mathbf{f}\|$ は上界 M をもち, $b - a \leq \rho/M$ を満たすならば, 初期値問題の解は少なくも一つ存在する.

定理 1.2 上の定理の仮定に加えて, f が領域 D で

$$\| f(t, \mathbf{x}) - f(t, \mathbf{y}) \| \leq L \| \mathbf{x} - \mathbf{y} \| \quad (1.5)$$

が成り立つならば, 初期値問題の解はただ一つである。

系 1.1 定理 1.1 の仮定に加えて, $f(t, \mathbf{x})$ が領域 D で連続な偏導函数 $\partial f / \partial \mathbf{x}$ をもつならば, 初期値問題の解はただ一つである。

偏導函数 $\partial f / \partial \mathbf{x}$ は, f の \mathbf{x} に関するヤコビ行列, すなわち $\partial f_i / \partial x_j$ を (i, j) 要素とする d 次正方行列

定理 1.2 の仮定 (1.5) は, 関数 f の (第 2 変数に関する) Lipschitz 連続性 (Lipschitz continuity)

定数 L を Lipschitz 定数

問題 1.1 微分方程式 (1.2) に初期条件

$$x(0) = a, \quad \frac{dx}{dt}(0) = 0$$

を課した初期値問題の解を, 解析的に求め, 定数 m, c, a の関係と, 解の様子を調べよ。

上記の定理の仮定はいずれも十分条件で, この条件をはずれているからといって解析解が一意存在しないとはいえない

以降で述べる離散変数解法による数値解法においては, 解析解の一意存在する初期値問題を対象とするのが暗黙の前提となるので, 微分方程式 (1.3) の右辺の函数 f にはこの程度の仮定はあるものと考える。

注意 1.1 常微分方程式という考え方方がいつ頃生れたかは, まだ研究の余地があるようである。文献

E. HAIRER, S. P. NØRSETT and G. WANNER: *Solving Ordinary Differential Equations I, Nonstiff Problems* (2nd rev. ed.), Springer-Verlag, 1993

によれば, それはやはり I. NEWTON に起源をもち, 微積分学と同様に古い。

1.3 非線型振動の数理モデル

電子回路の基本素子は, 抵抗器・コンデンサ・コイル。

回路方程式にそれぞれ抵抗 R , キャパシタンス C , インダクタンス L を付与

図 1.1 に示される閉回路の電流を i とすると, Kirchhoff の法則 (積分形) から

$$L \frac{di}{dt} + Ri + \frac{1}{C} \int i dt = 0 \quad (1.6)$$

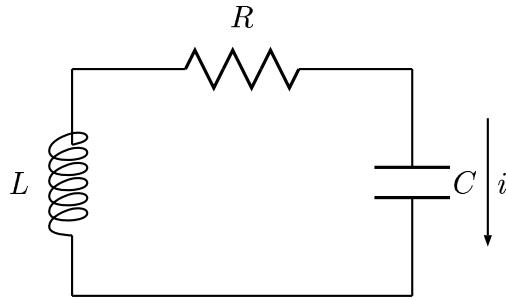


図 1.1: LCR 回路

$x = i, R/L = 2\alpha, 1/(LC) = \omega^2 (\omega > 0)$ とおけば

$$\frac{d^2x}{dt^2} + 2\alpha \frac{dx}{dt} + \omega^2 x = 0 \quad (1.7)$$

という 2 階常微分方程式

機械工学でも、質量 m の質点がばねの一端に結び付けられて、すべり抵抗のある平面の上に置かれているとき、微分方程式 (1.2) は

$$m \frac{d^2x}{dt^2} + k \frac{dx}{dt} + cx = 0$$

と変わる。ここで平面の抵抗係数は k .

$k/m = 2\alpha, c/m = \omega^2$ とおけば、(1.7) と全く一致。

(1.7) の左辺第 3 項は、ポテンシャル場が運動（振動）を引き起こすことを示し、第 2 項はそれに対する抵抗（減衰）

定数 α, ω のもとでの微分方程式の解は、一般には減衰振動 damped oscillation として知られており、 $\alpha > 0$ の条件のもとでは $x(t) \rightarrow 0 (t \rightarrow \infty)$ である。

問題 1.2 微分方程式 (1.7) の解の様子を、定数 α, ω の関係で論じよ。

LCR 回路を発展させ、図 1.2 に示される非線型素子 nonlinear element を含む回路を考察

この回路は、非線型素子が負性抵抗特性（電圧の増加にともない電流が減少する性質）をもつとき、発振回路となることが知られている。

素子の特性（電圧 v の変化がどのように電流 i に反映するか）を函数 $i = g(v)$ で表すとき、回路方程式はやはり Kirchhoff の法則（微分形）より

$$C \frac{dv}{dt} + g(v) + i = 0, \quad L \frac{di}{dt} - v = 0 \quad (1.8)$$

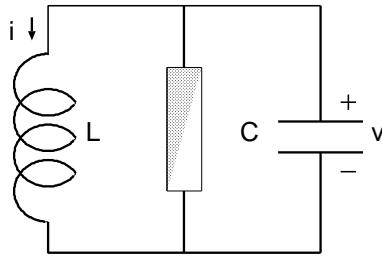


図 1.2: 非線型素子を含む発振回路

簡単のため, $C = L = 1$ とし, $g(v)$ は

$$g(v) = I_0 - v + \frac{1}{3}v^3 \quad (I_0 \text{ は定数}) \quad (1.9)$$

と与えられる（3次の非線型性）ものとし, $i + I_0$ を改めて i と書くと, 回路方程式は

$$\frac{dv}{dt} = v \left(1 - \frac{1}{3}v^2\right) - i, \quad \frac{di}{dt} = v \quad (1.10)$$

第1式を t で微分し, 第2式を用いて i を消去すると **van der Pol 方程式** (van der Pol equation)

$$\frac{d^2v}{dt^2} + (v^2 - 1) \frac{dv}{dt} + v = 0 \quad (1.11)$$

この方程式の解の時間変化をみると, 図 1.3 をえる. 実は, これは初期条件を $v(0) = 2$, $i(0) = 0$ のように与え, あとで述べる古典的 Runge-Kutta 法という数値解法を用いて求めた (1.10) の解である.

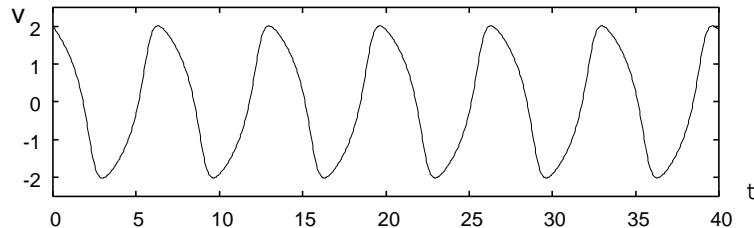


図 1.3: van der Pol 発振回路の電圧変化

非線型素子に発生する熱雑音を考慮すると, 回路のモデルは

$$dV(t) = \left[V(1 - \frac{1}{3}V^2) - I \right] dt + \sigma dW(t), \quad dI(t) = V dt \quad (1.12)$$

と表現できる.

ここで, $W(t)$ は, 1 次元標準 Wiener 過程 (Wiener process) と呼ばれる確率過程 random process, σ は (正の) 定数

式 (1.12) は確率的要素が含まれ, その正確な理解は容易ではないが, 確率微分方程式 stochastic differential equations (SDEs) と呼ばれる微分方程式に属する.

σ は, “雑音の大きさ”を表し, 素子の温度が上昇するほど, 大きくなる.

図 1.4 は, $\sigma = 0.2, 0.4, 0.6$ の場合, (1.12) に従う電圧 V を表している. 確率微分方程式の基本的な解法 (Euler・丸山スキーム) で求めた“解”である.

雑音が大きくなるほど, 確率的要素がない (確定論的) van der Pol 方程式の解 (破線で表示) と比べて波形がくずれ, 同時に周期が短くなる傾向が見られる.

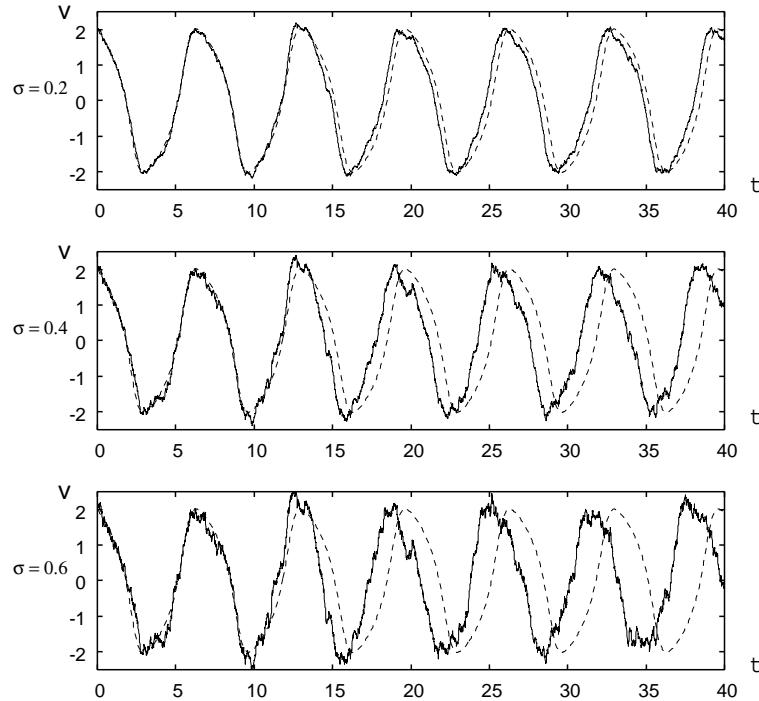


図 1.4: 热雑音のある van der Pol 発振回路の電圧変化

1.4 離散変数法の導入

1.4.1 離散変数法

以下, 常微分方程式の初期値問題

$$\frac{dx}{dt} = f(t, x) \quad (t_0 \leq t \leq t_F), \quad x(t_0) = x_0 \quad (1.13)$$

の数値解法の概要を述べる.

未知函数 $x(t): [t_0, t_F] \rightarrow \mathbb{R}^d$ $f: [t_0, t_F] \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$

f に関しては、つぎの条件を仮定。 $\|\cdot\|$ は \mathbb{R}^d 上のノルム。

(C) $f(t, x)$ は $[t_0, t_F] \times \mathbb{R}^d$ で定義された連続函数で、 x に関して大域的な Lipschitz 条件をみたす。すなわち、定数 γ が存在して

$$\|f(t, x) - f(t, y)\| \leq \gamma \|x - y\| \quad (1.14)$$

が任意の $t \in [t_0, t_F]$, $x, y \in \mathbb{R}^d$ について成立する。

区間 $[t_0, t_F]$ を小区間に分割し、独立変数の離散点を

$$t_0 < t_1 < \cdots < t_n < t_{n+1} < \cdots < t_N = t_F$$

ととる。 t_n をステップ点 step-points, 間隔 $h_n = t_{n+1} - t_n$ をステップ幅 step-width, step-size と言う。

実際の計算では、不等間隔のステップ点が用いられる場合もあるが、まず等間隔のステップ点を考える。すなわち、ステップ幅は n によらない一定値 $h = (t_F - t_0)/N$ とする。

$x(t_n)$: 第 n ステップ点における真の解の値

x_n : $x(t_n)$ の近似値

近似値 x_n ($n = 1, 2, \dots$) を、何らかの構成的な手段により求める方法を、一般に離散変数法 (discrete variable method) と言う。

最も簡単な離散変数法は、下の漸化式で与えられる Euler 法 (Euler method)

$$x_{n+1} = x_n + h f(t_n, x_n) \quad (1.15)$$

(t, x) 空間では

$$(t_0, x_0), (t_1, x_1), \dots, (t_n, x_n), (t_{n+1}, x_{n+1}), \dots$$

の点を、この順に結んだ折れ線として初期値問題の解を近似するので、Euler 法はしばしば折れ線法 (polygonal method) とも呼ばれる。

(1.15) のように、離散変数法によって近似列 $\{x_n\}$ を計算する具体的手順を示した式を、しばしばスキーム (scheme) という。

Euler 法は離散変数法の理論において重要であり、また一概に実用的でないとは言い切れないが、計算効率の面では良い方法ではない。そこで、離散変数法の効率を高めるという観点から、大別して二つの方向で Euler 法の改良がなされ。

(1) Runge-Kutta 法 (Runge-Kutta method)

s を自然数とし, 実数配列

$$\begin{array}{c|ccccc} 0 & & & & & \\ c_2 & a_{21} & & & & \\ c_3 & a_{31} & a_{32} & & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & \\ c_s & a_{s1} & a_{s2} & \cdots & a_{s,s-1} & \\ \hline & b_1 & b_2 & \cdots & b_{s-1} & b_s \end{array} \quad (1.16)$$

を与え, スキーム

$$\left\{ \begin{array}{l} k_1 = f(t_n, x_n) \\ k_2 = f(t_n + c_2 h, x_n + h a_{21} k_1) \\ k_3 = f(t_n + c_3 h, x_n + h a_{31} k_1 + h a_{32} k_2) \\ \vdots \\ k_s = f(t_n + c_s h, x_n + h a_{s1} k_1 + \cdots + h a_{s,s-1} k_{s-1}) \\ x_{n+1} = x_n + h(b_1 k_1 + b_2 k_2 + \cdots + b_s k_s) \end{array} \right. \quad (1.17)$$

によって x_n から x_{n+1} を計算する.

s : Runge-Kutta 法の段数 (number of stages)

(段数は, x_n から x_{n+1} を求める際の f の計算回数)

a_{ij} , b_i , c_i : Runge-Kutta 法の係数パラメータ

表記法 1 (1.17) を

$$k_i = f \left(t_n + c_i h, x_n + h \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} k_j \right), \quad x_{n+1} = x_n + h \sum_{i=1}^s b_i k_i$$

のように略記. $c_1 = 0$ を常に仮定.

表記法 2 $X_i = x_n + h \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} k_j$ なる変数を導入し

$$\left\{ \begin{array}{l} X_i = x_n + h \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} f(t_n + c_j h, X_j) \\ x_{n+1} = x_n + h \sum_{i=1}^s b_i f(t_n + c_i h, X_i) \end{array} \right.$$

あとでスキーム (1.17) をさらに一般化し, 陰的 Runge-Kutta 法を導入する. これと区別するため, (1.17) で与えられる方法を陽的 Runge-Kutta 法 (explicit Runge-Kutta method) と呼ぶことがある.

配列

| | | | | |
|-----|-----|-----|-----|-----|
| 0 | | | | |
| 1/2 | 1/2 | | | |
| 1/2 | 0 | 1/2 | | |
| 1 | 0 | 0 | 1 | |
| | 1/6 | 1/3 | 1/3 | 1/6 |

で与えられる係数パラメータに対応する

| | |
|-----------|-----------------------------------------------------------|
| k_1 | $= f(t_n, x_n)$ |
| k_2 | $= f\left(t_n + \frac{h}{2}, x_n + \frac{h}{2}k_1\right)$ |
| k_3 | $= f\left(t_n + \frac{h}{2}, x_n + \frac{h}{2}k_2\right)$ |
| k_4 | $= f(t_n + h, x_n + hk_3)$ |
| x_{n+1} | $= x_n + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$ |

の公式は最も良く知られていて、古典的 Runge-Kutta 法 (classical Runge-Kutta method) という。これを単に Runge-Kutta 法と呼んでいる文献もある。

(2) 線型多段階法 (linear multistep method)

k を自然数とし

$$\alpha_k \neq 0, \quad |\alpha_0| + |\beta_0| > 0$$

をみたす $2k+2$ 個の定数 α_j, β_j ($j = 0, 1, \dots, k$) を用いて

$$\sum_{j=0}^k \alpha_j x_{n+j} = h \sum_{j=0}^k \beta_j f(t_{n+j}, x_{n+j}) \quad (1.18)$$

のスキームをもつ離散変数法

k : 方法のステップ数 (number of steps) あるいは段階数

$k = 1, \alpha_1 = 1, \alpha_0 = -1, \beta_1 = 0, \beta_0 = 1$ ならば、Euler 法の公式 (1.15) に一致

$k = 2$ のとき

$$\alpha_2 = 1, \quad \alpha_1 = 0, \quad \alpha_0 = -1, \quad \beta_2 = 0, \quad \beta_1 = 2, \quad \beta_0 = 0$$

とおくと

$$x_{n+2} = x_n + 2hf(t_{n+1}, x_{n+1}) \quad (1.19)$$

なる線型多段階公式が得られる。

公式 (1.19) は、 $t = t_{n+1}$ にいおて微分方程式 $dx/dt = f(t, x)$ の左辺を中心差分 $(x_{n+2} - x_n)/2h$ で、右辺を $f(t_{n+1}, x_{n+1})$ で近似しているので、中点則 (midpoint rule) と呼ばれている。

式 (1.19) は 3 項の漸化式であり, $n = 0$ とすれば x_0 だけではなく x_1 の値も必要. この値を, 例えば Euler 法を使って $x_1 = x_0 + hf(t_0, x_0)$ と与えると, 以降は (1.19) によって, 順次 x_2, x_3, \dots が計算される.

一般に, ステップ数 k の多段階法 (k 段階法) は, $k+1$ 項の漸化式で定義され, 初期値以外に x_1, x_2, \dots, x_{k-1} を与えないと, 近似解の計算が進められない. これらの値を, 出発値 (starting values) といい (初期値を“出発値”に含める場合もある), 実際のプログラムでは, Runge-Kutta 法など一段階法を用いて計算する.

Adams 型公式 (Adams-type formula) 線型多段階法において特に $\alpha_k = 1, \alpha_{k-1} = -1$ とし, それ以外は $\alpha_j = 0$ とおいて得られる

$$x_{n+k} = x_{n+k-1} + h \sum_{j=0}^k \beta_j f(t_{n+j}, x_{n+j}) \quad (1.20)$$

を Adams 型公式という. 19世紀英國の天文学者 J.C. ADAMS にちなむ.

後退微分公式 (backward differentiation formula) 線型多段階法において特に $\beta_k = 1$ とし, それ以外を $\beta_j = 0$ とした

$$\sum_{j=0}^k \alpha_j x_{n+j} = hf(t_{n+k}, x_{n+k}) \quad (1.21)$$

で与えられる方法を後退微分公式 (略して BDF) という.

1.4.2 離散変数法評価の基準

離散変数法によって“近似解を効率良く求める”とは, いかなることであろうか. その基準となる概念として収束性と安定性を与えよう.

離散変数法の与える離散近似解が**収束** (convergent) する (「離散変数法が収束する」とも表現する) とは, ステップ幅 h を限りなく小さくしたとき, 近似解 x_n が厳密解 $x(t_n)$ に限りなく近づくことを言う.

定義 1.1 初期値, 出発値が条件

$$\lim_{h \downarrow 0} x_j = x(t_j) \quad (j = 0, 1, \dots, k-1) \quad (1.22)$$

をみたすものとする. そのとき

$$\lim_{h \downarrow 0} \left(\max_{k \leq n \leq N} \|x_n - x(t_n)\| \right) = 0 \quad (1.23)$$

が成り立つならば, 離散変数法は収束すると言う. (Runge-Kutta 法の場合は, $k = 1$ と考える.)

注意 1.2 ステップ幅 h と区間の分割数 N には $h = (t_F - t_0)/N$ の関係があるので、 $h \downarrow 0$ は $N \rightarrow \infty$ を意味することに注意。すなわち、(1.23) は無限個のステップを費やせば、真の値が得られると主張。

そのため、単に収束するだけでは実用上あまり有益な知識ではなく、条件

$$\|x_j - x(t_j)\| \leq C_0 h^p \quad (j = 0, 1, \dots, k-1) \quad (1.24)$$

のもとで

$$\max_{k \leq n \leq N} \|x_n - x(t_n)\| \leq Ch^p \quad (1.25)$$

となるような指数 p を求めることが重要。ここで、 h は十分小さく、 C_0 、 C は h には依存しない定数とする。このとき、数値解は $\mathcal{O}(h^p)$ で収束する、あるいは p 次収束する (convergent with p -th order) と言う。指数 p を **収束次数** (order of convergence) と呼び、ステップ幅 h が 0 に近づくとき、どのくらい“速く”誤差が減少するかの目安となる。

例題 1.1 初期値問題

$$\frac{dx}{dt} = (\cos t)x(2-x) \quad (0 \leq t \leq 10), \quad x(0) = 1 \quad (1.26)$$

Euler 法と中点則を適用して近似解を求め、それぞれの誤差を求める。

(1.26) の解は $x(t) = 2/[1 + \exp(-2 \sin t)]$

数値解の条件：初期値は $x_0 = 1$ 、中点則の出発値 x_1 は、Euler 法の近似値を使用 区間 $[0, 10]$ の分割数 N を $N = 40, 80, 160, \dots$ と変えた際の誤差

$$e_N = \max_{1 \leq n \leq N} \|x_n - x(t_n)\| \quad (1.27)$$

を表 1.1 に示した。

表 1.1 から観察できる事項

- Euler 法・中点則とも N が大きくなるにつれて、 e_N が減少する傾向にある
- 誤差の減少する“速さ”は、 N が倍になると、Euler 法の誤差はほぼ半分になるのに対して、中点則の誤差はほぼ $1/4$
($-\log_2 e_N$ つまり 2 進法での近似解の有効桁数の欄を見よ)
- Euler 法の誤差はほぼ $1/N$ に、中点則の誤差は $1/N^2$ に比例
ステップ幅 h に対して、Euler 法の誤差が $\mathcal{O}(h)$ 、中点則の誤差が $\mathcal{O}(h^2)$ を示すことは可能

表 1.1: 初期値問題 (1.26) に対するオイラー 法と中点則の誤差

| N | Euler 法 | | 中点則 | |
|------|-----------------------|---------------|-----------------------|---------------|
| | e_N | $-\log_2 e_N$ | e_N | $-\log_2 e_N$ |
| 40 | 6.72×10^{-1} | 0.57 | 8.83×10^{-3} | 6.82 |
| 80 | 2.57×10^{-1} | 1.96 | 2.10×10^{-3} | 8.90 |
| 160 | 1.13×10^{-1} | 3.15 | 5.20×10^{-4} | 10.91 |
| 320 | 5.29×10^{-2} | 4.24 | 1.30×10^{-4} | 12.91 |
| 640 | 2.57×10^{-2} | 5.28 | 3.24×10^{-5} | 14.92 |
| 1280 | 1.26×10^{-2} | 6.31 | 8.09×10^{-6} | 16.92 |
| 2560 | 6.27×10^{-3} | 7.32 | 2.02×10^{-6} | 18.92 |
| 5120 | 3.13×10^{-3} | 8.32 | 5.06×10^{-7} | 20.92 |

- この区間での離散変数法における f の計算回数は、ステップ数 N に一致するので、例えば Euler 法で $N = 5120$ 回の計算で得られる近似値（左の欄の一番下）よりも正確な値が、中点則では、 $N = 80$ 回の計算（右の欄の上から 2 番め）で、すでに得らる。

離散変数法の安定性 (stability)

例題 1.2 初期値問題

$$\frac{dx}{dt} = x(1-x) \quad (t \geq 0), \quad x(0) = 0.5 \quad (1.28)$$

に、 $h = 0.01$ の中点則を適用（出発値はやはり Euler 法で計算）すると、図 1.5 をうる。

この問題の厳密解は、 $x(t) = 1/(1 + e^{-t})$

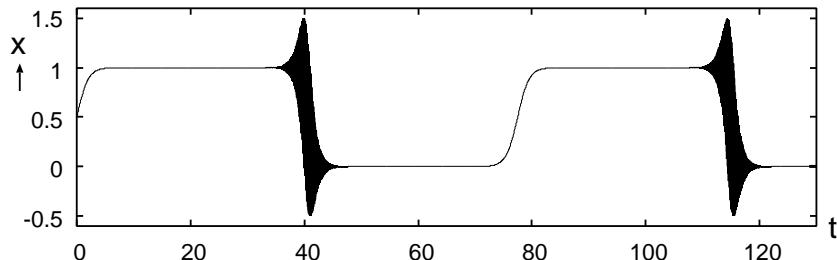


図 1.5: 初期値問題 (1.28) の中点則による近似解 ($h = 0.01$)

図 1.5 から観察されること

- 厳密解は t の増加とともに、いわゆロジスティック曲線 (logistic curve) を描いて、平衡点 $x = 1$ に近づく。

- 中点則による近似解は、 t が比較的小さい範囲 ($t \leq 20$ 程度) では、厳密解と同様な挙動を示し、値が平衡点に近づく。
- しかし、実は微小に振動していて、 $t = 38$ 付近で振動が目に見えて大きくなる。(黒く塗りつぶされたように見えるのは、近似値が上下に激しく振動しているため)
- ほどなく近似解の振動はおさまり、再度（初期条件の異なる）厳密解のごとくロジスティック曲線を描いて 1 に近づくが、 $t = 110$ 付近から再び激しく振動する。以降こうした振る舞いを繰り返す。
- 要するに、厳密解と、中点則による近似解とでは t に沿う振る舞いが大きく異なる。

現象の解析

厳密解の平衡点 $x = 1$ において、方程式 (1.28) を線型化すると $dx/dt = -x$ 。解 $x(t) = x_0 e^{-t}$ をもつこの微分方程式に中点則を適用すると、図 1.6 をえる。初期値 x_0 がなんであっても 0 に漸近すべき近似値が（振動しながら）発散。

数値的不安定現象 (numerical instability phenomenon)

平衡解への漸近という微分方程式の（漸近）安定性が、離散変数法による数値近似解において失われる現象。

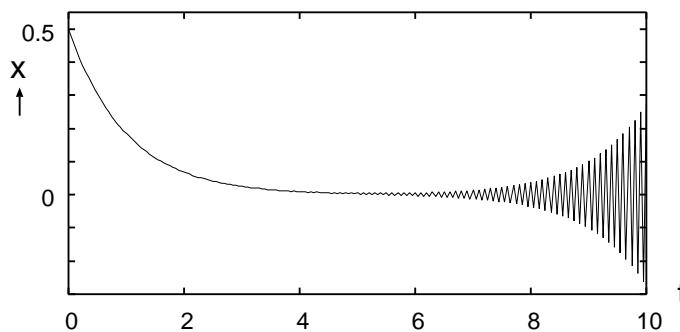


図 1.6: 方程式 $dx/dt = -x$ の中点則による近似解 ($h = 0.01$)

実は中点則は収束する離散変数法である。しかも収束次数は 2。この事実と数値的不安定性はどう関係するか？

中点則の不安定現象は、 $h = 0.01$ に限って起きるのではない。ステップ幅 h を限りなく小さくすれば ($h \downarrow 0$ とすれば)，特定の t の値に対して数値解は厳密解に限りなく近づく。しかし、正であるステップ幅 h を用いれば、いずれ必ず数値解の振動が起こる。 h が小さくなれば、激しい振動の起きる t の値が大きくなるだけ。

1.5 離散変数法の収束性

1.5.1 収束性定理

h をパラメータとし, t_n, x_n の函数である $\Phi(t_n, x_n; h)$ を用いて

$$x_{n+1} = x_n + h\Phi(t_n, x_n; h) \quad (1.29)$$

のように表される離散変数法を **一段階法** (single-step method) と言う。

Runge-Kutta 法のスキーム (1.17) は, 最後の $b_1 k_1 + b_2 k_2 + \dots + b_s k_s$ の部分を Φ とすればよい。また, 後退オイラー法 (backward Euler method)

$$x_{n+1} = x_n + h f(t_{n+1}, x_{n+1}) \quad (1.30)$$

は $\Phi = \Phi(t_n, x_n; h)$ を

$$\Phi = h f(t_n + h, x_n + h\Phi)$$

で定まる陰函数とすれば, 確かに (1.29) の形に表される。

線型多段階法 (1.18) も (1.29) の相当する形式に表現できる。

式 (1.18) より

$$x_{n+k} + \sum_{j=0}^{k-1} \alpha'_j x_{n+j} = h \sum_{j=0}^k \beta'_j f(t_{n+j}, x_{n+j}) \quad \left(\alpha'_j = \frac{\alpha_j}{\alpha_k}, \quad \beta'_j = \frac{\beta_k}{\alpha_k} \right) \quad (1.31)$$

とし, t_n およびベクトル

$$X_n = [x_{n+k-1}^T, x_{n+k-2}^T, \dots, x_n^T]^T \in \mathbb{R}^{kd} \quad (1.32)$$

の函数 $\Phi = \Phi(t_n, X_n; h)$ を

$$\Phi = \sum_{j=0}^{k-1} \beta'_j f(t_n + hj, x_{n+j}) + \beta'_k f \left(t_n + hk, h\Phi - \sum_{j=0}^{k-1} \alpha'_j x_{n+j} \right) \quad (1.33)$$

により陰に定義すると

$$x_{n+k} = - \sum_{j=0}^{k-1} \alpha'_j x_{n+j} + h\Phi(t_n, X_n; h) \quad (1.34)$$

こうすると, 一段階法 (1.29) は $k = 1$, $\alpha'_0 = -1$ とおいた (1.34) の特別な場合となる。そこで, (1.34) の $\Phi(t, X; h)$ を $[t_0, t_F] \times \mathbb{R}^{kd}$ から \mathbb{R}^d への連続函数として, 一段階法を実質的に包含する“一般的な離散変数法”的スキームを考え, 収束性の基準を一般的に取り扱う。ただし, Φ が单なる連続函数だけでは不足なので, f に関する条件 (C) (1.4.1 節) に対応して, 次の条件のもとで扱う。

(\hat{C}) 十分小さい h に対して, Φ は, h に関して一様な Lipschitz 条件をみたす. すなわち, h には依存しない定数 Γ が存在して

$$\|\Phi(t, X; h) - \Phi(t, Y; h)\| \leq \Gamma \|X - Y\| \quad (1.35)$$

が任意の $t \in [t_0, t_F]$, $X, Y \in \mathbb{R}^k$ について成立する. ここで, $\|\cdot\|$ は \mathbb{R}^{kd} のノルム.

注意: Runge-Kutta 法はすぐわかるが, 線型多段階法の場合でも条件 (\hat{C}) は条件 (C) から導かれる.

定義 1.2 (局所誤差) 初期値問題 (1.13) の厳密解 $x(t)$ によって $x_j = x(t_j)$ ($j = n, n+1, \dots, n+k-1$) が成り立つとき, (1.34) が与える x_{n+k} の値を \hat{x}_{n+k} とし, 真値 $x(t_{n+k})$ と \hat{x}_{n+k} の差

$$e_n = x(t_{n+k}) - \hat{x}_{n+k} \quad (1.36)$$

を離散変数法の局所誤差 (local error) と言う.

スキーム (1.34) に含まれる $x_n, x_{n+1}, \dots, x_{n+k-1}$ は後方値 (back values) と呼ばれるが, この定義はそれらが真の値に等しいと仮定 (これを“局所性の仮定” (localization assumption) ということがある) したとき, 次のステップでどの程度の誤差が生じるかを見ている.(図 1.7 参照)

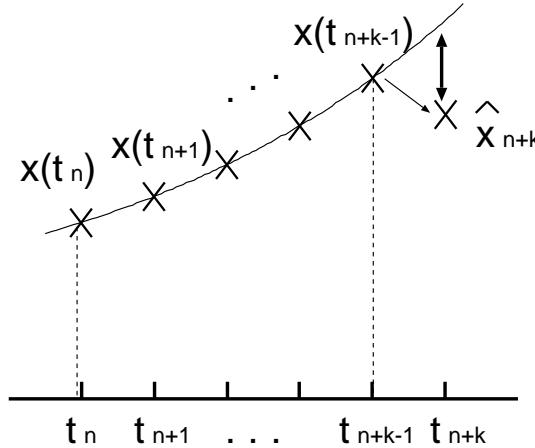


図 1.7: 離散変数法の局所誤差

定義 1.3 離散変数法のスキーム (1.34) に付随して導入される代数方程式

$$\zeta^k + \alpha'_{k-1}\zeta^{k-1} + \cdots + \alpha'_1\zeta + \alpha'_0 = 0 \quad (1.37)$$

の根の絶対値が, すべて 1 以下であり, しかも絶対値 1 の根は单根に限るとき, 離散変数法 (1.34) は, ゼロ安定 (zero-stable) であると言う.

一段階法の場合, (1.37) は $\zeta - 1 = 0$ となることから, 無条件でゼロ安定.

中点則の場合は, “ $\zeta^2 - 1 \implies \zeta = \pm 1$ ” ゆえ, アダムス型の公式 (1.20) の場合も, “ $\zeta^k - \zeta^{k-1} = 0 \implies \zeta = 0$ ($k-1$ 重根), 1” より, ゼロ安定の条件が成立している.

定理 1.3 函数 f は条件 (C), Φ は条件 (\hat{C}) をみたすものとする. そのとき, 以下の二つの条件が成り立つならば, 離散変数法の数値解は $\mathcal{O}(h^p)$ で収束する.

(C₀) 離散変数法は, ゼロ安定である.

(C₁) 十分小さい h に対して, 局所誤差 (1.36) に対して

$$\boxed{\max_{0 \leq n \leq N-k} \|e_n\| \leq C_1 h^{p+1}} \quad (1.38)$$

の評価が成り立つ. ここで, C_1 は h に依存しない定数.

1.5.2 Runge-Kutta 法の収束次数

定理 1.3 より, 局所誤差の評価, 特にその収束次数が重要であることがわかる. Runge-Kutta 法の場合それはどう与えられるであろうか.

通常 Runge-Kutta 法の係数パラメータには条件

$$\sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} = c_i \quad (i = 2, 3, \dots, s), \quad \sum_{j=1}^s b_j = 1 \quad (1.39)$$

の関係を課す. これは非自励系の方程式 $dx/dt = f(t, x)$ に対しても, 自励系の方程式 $dx/dt = f(x)$ に対しても, スキームが異なることがないという自然な要請から導かれる.

このとき局所誤差を定める \hat{x}_{n+1} は

$$k_i = f \left(x(t_n) + h \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} k_j \right), \quad \hat{x}_{n+1} = x(t_n) + h \sum_{i=1}^s b_i k_i \quad (1.40)$$

により定義される. 収束次数は, $x(t_n)$ を定数とみなし, \hat{x}_{n+1} の h に関する Maclaurin 展開を求め, これと $x(t_{n+1})$ の同じ展開とを比較することで, 導くことができる.

たとえば, 係数パラメータが以下の (1.41) の第 1 式をみたすならば h の項まで, 第 1 式と第 2 式をみたすならば, h^2 の項まで, 4 式すべてをみたすならば h^3 の項まで一致する. つまり, それぞれ局所誤差は $\mathcal{O}(h^2)$, $\mathcal{O}(h^3)$, $\mathcal{O}(h^4)$ となり, $p = 1, 2, 3$ のそれぞれに対する条件 (C₁) が成立する.

$$\boxed{\sum_{i=1}^s b_i = 1, \quad \sum_{i=1}^s b_i c_i = \frac{1}{2}, \quad \sum_{i=1}^s b_i c_i^2 = \frac{1}{3}, \quad \sum_{i=1}^s \sum_{j=1}^{i-1} b_i a_{ij} c_j = \frac{1}{6}} \quad (1.41)$$

条件 (1.39) も含めて、収束次数が得られるために係数パラメータがみたさなければならない関係式を、次数条件式 (order conditions) と言う。一般的の次数条件式を導くには \hat{x}_{n+1} , $x(t_{n+1})$ をさらに高次の項まで展開し、係数を比較するが、その手間は次数が増えるにつれて飛躍的に大きくなる。

この導出をきわめて見通しのよい過程にしたのが、J. C. BUTCHER による根つき木 (rooted tree) 解析の導入である。詳しくは参考文献を参照。結果だけ述べると

定理 1.4 条件 $c_i = \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}$ ($2 \leq i \leq s$) のもとで、 p 次の次数条件式は、頂点数が p 以下の根つき木と 1 対 1 に対応する。

たとえば、 $p = 1, 2, 3$ に対する次数条件 (1.41) と根つき木との対応は図 1.8。

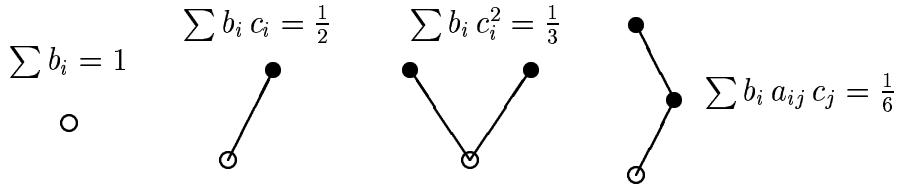


図 1.8: 3 次の次数条件式の根つき木

Runge-Kutta 法の例 Euler 法を 1 段 Runge-Kutta 法とみれば、(1.41) の第 1 式を満たすので、1 次。

2 段 (すなわち, $s = 2$) では,, (1.41) の第 1 式と第 2 式を、例えば $a_{21} = c_2 = 1$, $b_1 = b_2 = 1/2$ として満たす。対応する Runge-Kutta 公式

| |
|---------------------------------------------------------------------------------------------|
| $k_1 = f(t_n, x_n)$ $k_2 = f(t_n + h, x_n + hk_1)$ $x_{n+1} = x_n + \frac{h}{2}(k_1 + k_2)$ |
|---------------------------------------------------------------------------------------------|

を Heun 法 (Heun method) という。3 次, 4 次もそれぞれ、 $s = 3, 4$ で対応する公式ができる。古典的 Runge-Kutta 法は 4 段 4 次の例である。

一般に、 p が偶数の場合、段数 $s = p^2/4 + 1$ とすれば、 p 次の Runge-Kutta 法を作ることができる。しかし、 $p = 4$ の場合 ($p^2/4 + 1 = 5$) からも分かるように、これは、“最良の結果”ではない。段数 s を最小いくつに取れば、所与の次数の公式を構成できるかという問題は、非常な難問である。現在知られている結果をまとめると、表 1.2 となる。

表 1.2: 次数を達成するための最小段数

| 次 数 | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 |
|------|---|---|---|---|---|---|---|----|
| 最小段数 | 1 | 2 | 3 | 4 | 6 | 7 | 9 | 11 |

1.5.3 線型多段階法の収束次数

線型多段階法の場合、局所性の仮定のもとでの \hat{x}_{n+k} は

$$\begin{aligned}\alpha_k \hat{x}_{n+k} + \sum_{j=0}^{k-1} \alpha_j x(t_{n+j}) &= h\beta_k f(t_{n+k}, \hat{x}_{n+k}) + h \sum_{j=0}^{k-1} \beta_j f(t_{n+j}, x(t_{n+j})) \\ &= h\beta_k f(t_{n+k}, \hat{x}_{n+k}) + h \sum_{j=0}^{k-1} \beta_j x'(t_{n+j})\end{aligned}$$

を満たす。そこで、1回微分可能な函数 $x(t)$ に対して線型作用素 \mathcal{L} を

$$\mathcal{L}(x, t; h) = \sum_{j=0}^k [\alpha_j x(t + jh) - h\beta_j x'(t + jh)] \quad (1.42)$$

とおくと、初期値問題の解 $x(t)$ については

$$\alpha_k (x(t_{n+k}) - \hat{x}_{n+k}) - h\beta_k [f(t_{n+k}, x(t_{n+k})) - f(t_{n+k}, \hat{x}_{n+k})] = \mathcal{L}(x, t_n; h)$$

が関係が成り立ち、これより

$$\begin{aligned}(\alpha_k I_d - hF)(x(t_{n+k}) - \hat{x}_{n+k}) &= \mathcal{L}(x, t_n, h) \\ F &= \int_0^1 D_x f(t_{n+k}, \theta x(t_{n+k}) + (1-\theta)\hat{x}_{n+k}) d\theta\end{aligned} \quad (1.43)$$

が得られる。 $D_x f$ は f の x に関するヤコビ行列。

x が何回も微分可能ならば、(1.43) より

$$\begin{aligned}\mathcal{L}(x, t_n; h) &= \sum_{j=0}^k \left(\sum_{q \geq 0} \alpha_j \frac{j^q h^q}{q!} x^{(q)}(t_n) + h \sum_{r \geq 0} \beta_j \frac{j^r h^r}{q!} x^{(r)}(t_n) \right) \\ &= \left(\sum_{j=0}^k \alpha_j \right) x(t_n) + \sum_{q \geq 1} \frac{h^q}{q!} \left(\sum_{j=0}^k \alpha_j j^q - q \sum_{j=0}^k \alpha_j j^{q-1} \right) x^{(q)}(t_n)\end{aligned}$$

のように展開される。ゆえに (1.42) の右辺の h に関するベキ級数展開を求めるこによつて、線型多段階法の次数条件式

$$\sum_{j=0}^k \alpha_j = 0, \quad \sum_{j=0}^k \alpha_j j^q = q \sum_{j=0}^k \beta_j j^{q-1} \quad (q = 1, 2, \dots, p) \quad (1.44)$$

がえられる。つまり、線型多段階法の次数条件式は $p + 1$ 個の連立一次方程式。

一般に k 段階法の係数には $2k + 1$ の自由度があり（式 (1.31) 参照），最大 $p = 2k$ までの次数条件式を満たすことができる。ただし，収束性のためにはさらに (C_0) のゼロ安定性の条件がみたされる必要があり，ゼロ安定性も込めて考えると， k 段階法で到達できる最大次数は

- k が奇数の場合は $p = k + 1$
- k が偶数の場合は $p = k + 2$
- さらに $\beta_k = 0$ （陽的）とすると， k が奇数，偶数いずれの場合も $p = k$

これを **Dahlquist の障害** (Dahlquist barrier) (G. DAHLQUIST, 1956) という。

具体的な線型多段階法の次数

(1) 中点則 (1.19) にみるように $\alpha_2 = 1, \alpha_1 = 0, \alpha_0 = -1, \beta_2 = 0, \beta_1 = 2, \beta_0 = 0$ なので， $p = 2$ に対する (1.44) をみたして，2 次の方法。

(2) Adams 型公式 (1.20) で $\beta_k = 0$ とすると， $p = k$ に対する方程式 (1.44) は

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 0 & 1 & 2 & \cdots & k-1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 1^{q-1} & 2^{q-1} & \cdots & (k-1)^{q-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 1^{k-1} & 2^{k-1} & \cdots & (k-1)^{k-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_{k-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ (2k-1)/2 \\ \vdots \\ [k^q - (k-1)^q]/q \\ \vdots \\ [k^k - (k-1)^k]/k \end{bmatrix} \quad (1.45)$$

となる。右辺の行列は Vandermonde 形なので，行列式の非ゼロ。したがって係数行列は正則で，パラメータ $\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_{k-1}$ が一意に定まる。収束次数 $p \leq 5$ の Adams 型公式は以下のように与えられる。 $(f_n = f(t_n, x_n))$ このようにして得られる一連の公式は，**陽的 Adams 公式** (explicit Adams formula) と呼ばれている。

$$\begin{aligned} x_{n+1} &= x_n + hf_n \quad (p=1) \\ x_{n+2} &= x_{n+1} + \frac{h}{2}(3f_{n+1} - f_n) \quad (p=2) \\ x_{n+3} &= x_{n+2} + \frac{h}{12}(23f_{n+2} - 16f_{n+1} + 5f_n) \quad (p=3) \\ x_{n+4} &= x_{n+3} + \frac{h}{24}(55f_{n+3} - 59f_{n+2} + 37f_{n+1} - 9f_n) \quad (p=4) \\ x_{n+5} &= x_{n+4} + \frac{h}{720}(1901f_{n+4} - 2774f_{n+3} + 2616f_{n+2} - 1274f_{n+1} + 251f_n) \quad (p=5) \end{aligned}$$

$\beta_k \neq 0$ のときには $p = k + 1$ 次の公式が構成でき、**陰的 Adams 公式** (implicit Adams formula) と呼ばれる。やはり、 $p \leq 5$ の公式を示すと、以下のようになる。

$$\begin{aligned} x_{n+1} &= x_n + \frac{h}{2} (f_{n+1} + f_n) \quad (p=2) \\ x_{n+2} &= x_{n+1} + \frac{h}{12} (5f_{n+2} + 8f_{n+1} - f_n) \quad (p=3) \\ x_{n+3} &= x_{n+2} + \frac{h}{24} (9f_{n+3} + 19f_{n+2} - 5f_{n+1} + f_n) \quad (p=4) \\ x_{n+4} &= x_{n+3} + \frac{h}{720} (251f_{n+4} + 646f_{n+3} - 264f_{n+2} + 106f_{n+1} - 19f_n) \quad (p=5) \end{aligned}$$

これら Adams 型公式の係数は、実際には (1.44) を解くことで決めるのではない。それを導く構成原理から、漸化関係をえて、順次生成することができる。詳しくは

三井 犢友, “常微分方程式の数値解法”, 岩波書店, 2003.

例題 1.3 二体問題 (two-body problem) の方程式

$$\begin{cases} \frac{dx_1}{dt} = x_3, & \frac{dx_2}{dt} = x_4, \\ \frac{dx_3}{dt} = -\frac{x_1}{r^3}, & \frac{dx_4}{dt} = -\frac{x_2}{r^3} \end{cases} \quad \left(r = \sqrt{x_1^2 + x_2^2} \right) \quad (1.46)$$

に対して、初期条件を

$$x_1(0) = 1 - e, \quad x_2(0) = x_3(0) = 0, \quad x_4(0) = \sqrt{\frac{1+e}{1-e}} \quad (1.47)$$

と与える。(e は $0 \leq e < 1$ をみたす実数) そのとき、初期値問題 (1.46), (1.47) の厳密解は

$$E(t) - e \sin E(t) = t \quad (1.48)$$

で定まる函数 $E(t)$ を使って

$$\begin{aligned} x_1(t) &= \cos E(t) - e, & x_2(t) &= \sqrt{1-e^2} \sin E(t) \\ x_3(t) &= \frac{\sin E(t)}{e \cos E(t) - 1}, & x_4(t) &= \frac{\sqrt{1-e^2} \cos E(t)}{1 - e \cos E(t)} \end{aligned} \quad (1.49)$$

と表される。これを陽的 Adams 公式を含む離散変数法で解く。((1.48) は **Kepler の方程式** (Kepler equation) と呼ばれている。)

表 1.3, 1.4, 1.5 は、この問題 ($e = 0.5$) を古典的 Runge-Kutta 法, 4 次陽的 Adams 法, 5 次陽的 Adams 法で解いた際の誤差を表わしている。解を求める範囲は $0 \leq t \leq 10$, 区間 $[0, 10]$ の分割数 N を変え

$$\varepsilon_N = \max_{1 \leq n \leq N} \|x_n - x(t_n)\|_\infty$$

表 1.3: 古典的 Runge-Kutta 法の例題 1.3に対する誤差

| | | | | | | | |
|-------------------------|------|------|-------|-------|-------|-------|-------|
| N | 80 | 160 | 320 | 640 | 1280 | 2560 | 5120 |
| N_f | 320 | 640 | 1280 | 2560 | 5120 | 10240 | 20480 |
| $-\log_2 \varepsilon_N$ | 5.07 | 9.62 | 13.99 | 18.21 | 22.34 | 26.40 | 30.44 |

表 1.4: 4 次陽的 Adams 法の例題 1.3に対する誤差

| | | | | | | | |
|-------------------------|------|------|-------|-------|-------|-------|-------|
| N | 320 | 640 | 1280 | 2560 | 5120 | 10240 | 20480 |
| N_f | 330 | 650 | 1290 | 2570 | 5130 | 10250 | 20490 |
| $-\log_2 \varepsilon_N$ | 4.61 | 8.49 | 12.45 | 16.43 | 20.42 | 24.42 | 28.42 |

とし， $-\log_2 \varepsilon_N$ を表示. 厳密解の値は，Kepler の方程式 (1.48) を Newton 反復法で解いて，算出. また，Adams 法の出発値の計算は，いずれも古典的 Runge-Kutta 法による. また，表中の N_f は f の函数計算の総数 (f_1, f_2, f_3, f_4 全部の計算を一回と数える) を表わし，Adams 法では出発値の計算における函数計算の回数も N_f に含めてある.

図 1.9 は，表に示した結果を，横軸 $\log_2 N_f$ ，縦軸 $-\log_2 \varepsilon_N$ にプロットしたグラフ
数値計算結果から観察される事項

- 収束次数の特性を反映して，おおむね 4 次法の結果は傾き 4 の直線上に，5 次法の結果は傾き 5 の直線上にある（点線の線分は“傾き 4”に対応）
- グラフでは，点が上方に位置するほど，少ない計算回数で正確な値が得られ，“計算効率の良い解法”に対応
- グラフをこのまま右に延長して行けば，5 次法の結果が 4 次法の結果をしのぐことは容易に想像できるが，この図に示される範囲の大半で，5 次の Adams 法のほうが 4 次の Runge-Kutta 法よりも“計算効率が悪い”

表 1.5: 5 次陽的 Adams 法の例題 1.3に対する誤差

| | | | | | | | |
|-------------------------|------|------|-------|-------|-------|-------|-------|
| N | 320 | 640 | 1280 | 2560 | 5120 | 10240 | 20480 |
| N_f | 333 | 653 | 1293 | 2573 | 5133 | 10253 | 20493 |
| $-\log_2 \varepsilon_N$ | 2.52 | 7.51 | 11.31 | 15.93 | 20.78 | 25.71 | 30.67 |

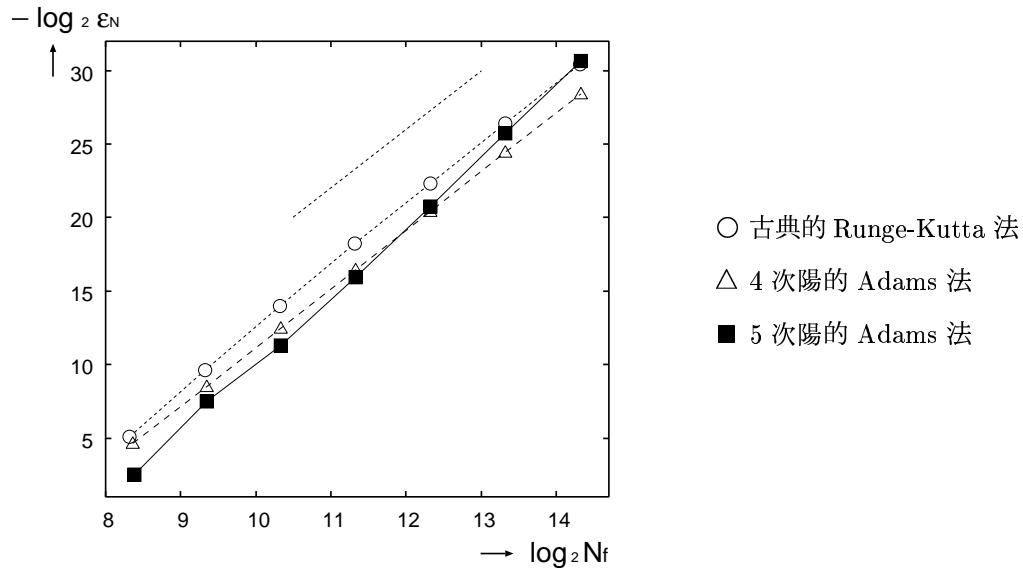


図 1.9: 例題 1.3 に対する数値解法の誤差のふるまい

1.6 安定性解析

1.4 節で述べた“数値的不安定現象”を考えると、離散変数法の安定性は、誤差の主要なふるまいを支配すると考えられる第一変分方程式と呼ばれる線型方程式に、その離散変数法を適用したときの解析を行うことで達成できる。これを線型安定性解析という。

$$\frac{dx}{dt} = Lx \quad (L \text{ は } d \text{ 次正方行列}) \quad (1.50)$$

に対する離散変数法の特性を考える。

L は対角化可能と仮定。正則行列 T を用いて、 $T^{-1}LT = \Lambda$ と相似変換可能。

$$\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_w, \dots, \lambda_d)$$

$$\lambda_k \ (k = 1, 2, \dots, d): L \text{ の固有値}$$

$$T^{-1} \frac{dx}{dt} = T^{-1} L x = T^{-1} L T \cdot T^{-1} x = \Lambda T^{-1} x$$

であるから、変数変換 $y(t) = T^{-1}x(t)$ により、(1.50) は $dy/dt = \Lambda y$ 、すなわち

$$\frac{dy_k}{dt} = \lambda_k y_k \quad (k = 1, 2, \dots, d) \quad (1.51)$$

に帰着される。

$\forall \lambda; \Re \lambda_k < 0$ であれば、

$$x(t) \rightarrow 0 \quad (t \rightarrow \infty) \quad (1.52)$$

が成り立つ（漸近安定性）．方程式 (1.50) にステップ幅 $h > 0$ で離散変数法を適用した際に， 同様の性質

$$x_n \rightarrow 0 \quad (n \rightarrow \infty) \quad (1.53)$$

が成り立つ条件を考察．

ステップ幅 $h > 0$ で固定， $h \downarrow 0$ （収束性解析）ではない

Runge-Kutta 法，線型多段階法とも，スキームが $x_j, f_j = f(t_j, x_j)$ に関する線型演算で構成されていることを考慮すると，線型安定性解析は単独方程式

$$\frac{dx}{dt} = \lambda x \quad (\lambda \in \mathbb{C}) \quad (1.54)$$

に適用して，仮定 $\Re \lambda < 0$ をみたす任意の λ に対する条件を求めるために帰着できる．この方程式 (1.54) を安定性のテスト方程式 (test equation) という．

1.6.1 Runge-Kutta 法の安定性解析

Runge-Kutta 法を (1.54) に適用すると， $\hat{k}_i = hk_i$ ， $z = h\lambda$ とおいて

$$\hat{k}_i = z \left(x_n + \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \hat{k}_j \right), \quad x_{n+1} = x_n + \sum_{i=1}^s b_i \hat{k}_i$$

と表される．順次計算を進めると

$$\begin{aligned} \hat{k}_1 &= zx_n, & \hat{k}_2 &= z \left(x_n + a_{21} \hat{k}_1 \right) = (z + a_{21} z^2) x_n, \\ \hat{k}_3 &= z \left(x_n + a_{31} \hat{k}_1 + a_{32} \hat{k}_2 \right) = [z + (a_{31} + a_{32}) z^2 + a_{31} a_{32} z^3] x_n, & \dots \end{aligned}$$

となり，最終的には

$$x_{n+1} = R(z)x_n \quad (R(z) \text{ は } z \text{ の } s \text{ 次多項式})$$

一方，テスト方程式の真の解は $x(t) = e^{\lambda(t-t_n)}x(t_n)$ と表されるから，局所誤差は $x(t_{n+1}) - \hat{x}_{n+1} = [e^z - R(z)]x(t_n)$ ．したがって，Runge-Kutta 法が p 次であれば， $R(z)$ は e^z の Maclaurin 展開と z^p の項まで一致すべき．すなわち

$$R(z) = 1 + z + \frac{1}{2!}z^2 + \dots + \frac{1}{p!}z^p + \gamma_{p+1}z^{p+1} + \dots + \gamma_s z^s$$

$\gamma_{p+1}, \dots, \gamma_s$ は，RK 法のパラメータから定まる定数．

特に， $R(h\lambda) = 1 + h\lambda + \mathcal{O}(h^2)$ から

$$|R(h\lambda)|^2 = 1 + 2h\Re \lambda + \mathcal{O}(h^2) \quad (1.55)$$

したがって $\Re \lambda < 0$ ならば，十分小さい $h > 0$ に対して， $|R(h\lambda)|$ は 1 より小となり，テスト方程式の解について (1.53) が成立する． λ が行列 L の固有値であるので（一般には行列の Jordan 標準形を用いて），つきの定理が得られる．

定理 1.5 行列 L のすべて固有値が $\Re \lambda_k < 0$ をみたし, Runge-Kutta 法は少なくとも 1 次であるとする. そのとき $h_0 > 0$ が存在して, $h < h_0$ ならば方程式 (1.50) の任意の近似解 x_n について, (1.53) が成り立つ.

この定理より, 複素平面上の領域

$$\mathcal{R} = \{z \in \mathbb{C} : |R(z)| < 1\} \quad (1.56)$$

を導入し, Runge-Kutta 法の**安定性領域** (stability region) と呼ぶ. Runge-Kutta 法が 1 次以上ならば, \mathcal{R} は空集合ではない. また, 多項式 $R(z)$ を Runge-Kutta 法の**安定性函数** (stability function) と言う.

具体的な安定性領域 Euler 法, Heun 法, 古典的 Runge-Kutta 法のように段数 s と次数 p が一致している場合, 安定性領域は図 1.10 のようになる. $z = h\lambda$ であるから, 安定性領域が広い解法ほど, 定理 1.5 の h_0 は大きい. Runge-Kutta 法の安定性領域は, 次数 p が大きいほど広くなる傾向にあり, したがって次数の高い方法ほど大きなステップ幅でも微分方程式の安定性が保たれる.

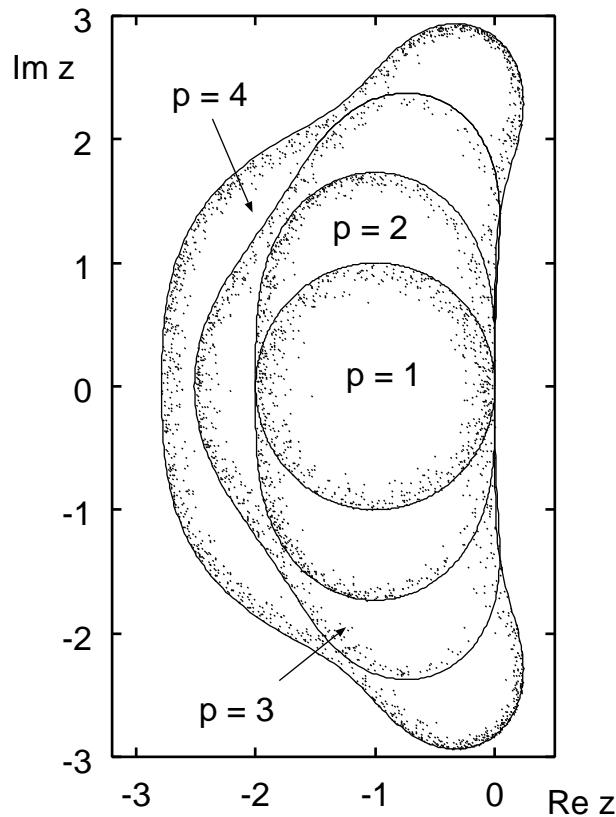


図 1.10: $s = p$ となる Runge-Kutta 法の安定性領域

1.6.2 線形多段階法の安定性解析

線型多段階法をテスト方程式 (1.54) に適用すると

$$\sum_{j=0}^k \alpha_j x_{n+j} = h \sum_{j=0}^k \beta_j \lambda x_{n+j} \quad (1.57)$$

が成り立つ。これは（定数係数）線型差分方程式と呼ばれ、この解の振る舞いが解析できる。

多項式 $\rho(\zeta)$, $\sigma(\zeta)$ を

$$\rho(\zeta) = \sum_{j=0}^k \alpha_j \zeta^j, \quad \sigma(\zeta) = \sum_{j=0}^k \beta_j \zeta^j$$

により定義し、 $z = h\lambda$ とおくと、(1.57) の特性方程式は

$$\rho(\zeta) - z\sigma(\zeta) = \sum_{j=0}^k (\alpha_j - z\beta_j) \zeta^j = 0 \quad (1.58)$$

なる、複素数 z の一次式を係数とする ζ に関する k 次の代数方程式。

差分方程式 (1.57) のすべての解が (1.53) をみたす必要十分条件は、特性方程式 (1.58) のすべての根が $|\zeta| < 1$ であることが知られている。これより、線型多段階法の安定性領域をつぎのように定義するのが自然であろう。

$$\mathcal{R} = \{z \in \mathbb{C} : (1.58) \text{ のすべての根が } |\zeta| < 1 \text{ をみたす}\} \quad (1.59)$$

中点則の場合 中点則では (1.58) は $\zeta^2 - 2z\zeta - 1 = 0$ なる二次方程式となる。2根を ζ_1, ζ_2 とすると、根と係数の関係により、 $\zeta_1 \zeta_2 = -1$ 特に、 $|\zeta_1||\zeta_2| = 1$ である。したがって、いかなる z に対しても $|\zeta_1| < 1, |\zeta_2| < 1$ とは成り得ず、安定性領域は空である。

Adams 法の場合 一般に安定性領域は空集合ではないことが証明できる。 \mathcal{R} の境界を数値計算で求めることにより、図 (1.11) の安定性領域がえられる。

Runge-Kutta 法の場合とは逆に、次数 p が大きくなるにつれて安定性領域が狭くなる傾向が見られる。また、同じ次数で陽公式と陰公式を比べると、陰公式の安定性領域のほうが広い。

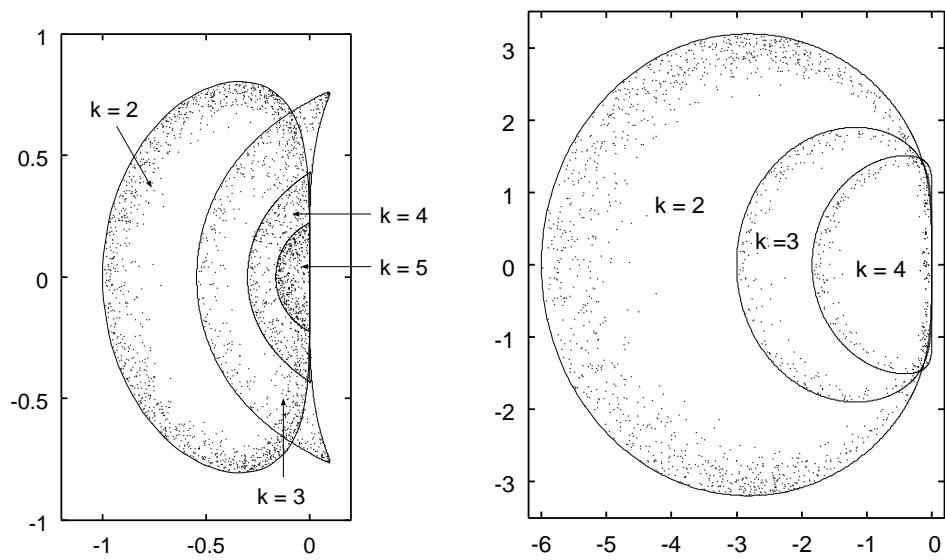


図 1.11: Adams 法の安定性領域（左が陽公式，右が陰公式）